



TITLE:

少数自由度量子カオス系における
自発的な散逸の発生(第3回『非平
衡系の統計物理』シンポジウム(そ
の1),研究会報告)

AUTHOR(S):

池田, 研介

CITATION:

池田, 研介. 少数自由度量子カオス系における自発的な散逸の発生(第
3回『非平衡系の統計物理』シンポジウム(その1),研究会報告). 物性研
究 1996, 66(1): 45-64

ISSUE DATE:

1996-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/95722>

RIGHT:

少数自由度量子カオス系における自発的な散逸の発生

池田 研介

立命館大学理工学部物理、525 草津市野路町 1 9 1 6

ABSTRACT

古典極限でカオスになる少数自由度量子系(量子カオス系)において散逸が自発的に相転移をへて発生することを精密な数値実験と半古典理論解釈をもとに主張する。ホスト+ヘルパー系と呼ばれるクラスの系が試された。まず、量子散逸が発生するために必要な古典的条件が論じられ、ついでシミュレーションの結果からえられたいくつかの普遍的な性質とそれにもとづく推論が提示される。さいごに半古典論が展開され、カオス軌道一般が内在する相関が議論され、相関打ち消し機構がどのように働いて散逸発生をうながすかがあきらかされる。この記事は文献[1],[2],[3]に掲載された内容の要旨である。内容は以下の通り

1 序論

2 古典的必要条件と量子散逸の直接検出法

2・1 古典的条件—大域的経路の発生

2・2 模擬的光吸収実験

3 自発的な散逸の発生

3・1 ホスト+ヘルパー系

3・2 実験事実にもとづく主張

4 半古典論

4・1 多自由度カオス系への半古典論の適用—記憶展開

4・2 軌道間相関とそれを打ち消す機構

5 エピローグ

1. 序論

この研究は、量子カオスと非可逆性および散逸の起源との関係を解明したいという動機に端を発している^{[1], [2], [3]}。古典力学系のカオスから考えてみよう。非可逆性とは現在から過去を取り戻す手続きの複雑さを表す概念である事を考えるならば、カオス特有の指数関数的増幅が非可逆性をもたらすことは想像にかたくない。実際、 t 秒前の初期状態を快復するためには仮に完全な時間反転を達成するアルゴリズムをもっている、現在の状態を t に比例した桁の精度で制御することが必要になる。これはコルモゴロフの意味でアルゴリズム的複雑さが有限なることを意味し、大変に困難な動作である。一方Prigogineらに代表されるようにカオス系のアンサンブルを考えると、微小変位の指数的大増大は時間の矢の発生をきわめて自然に導入することを可能にする。任意のスケールのなめらかな位相空間内の分布は観測の精度が有限であるかぎり、必ずより不確定になってゆく。すなわち時間発展のたびに同じ割合で情報(=多様さ)が生成されてゆく一方である。このことがカオスを非可逆性と結びつけるもっとも直感的なイメージをあたえている。

しかし量子論になると状況は一変する。純粋状態から全てを導き出すという立場(アンサンブルは、手で入れるものではなく力学系の発展によって不可避免的に純粋状態から形成されるものであるという立場を意味する。)を一貫するならば、アンサンブルに対応するものを量子論に求めれば波動関数になる。しかし、量子論の波動関数は強い相関を内包しており、相関を持たない古典論のアンサンブルと質を著しく異にする。この様な量子系特有の事情はまさに不確定性原理の帰結である。不確定性、あるいは相関は果てしなく微細な構造を要求するカオスの発現を抑止するように作用しカオス特有の指数関数的な記憶喪失(あるいは情報の生成)を決してもたらさない(もっとも散乱問題では指数関数的記憶喪失が存在するがそれはカオスのためではなく、無限に広がった境界条件のためである。)しかし一方、量子論がカオスの存在を根柢的に否定するわけではない。＜カオス＞概念を少し拡張して、指数関数的でなくとも記憶喪失が存在しさえ良いとするならば、量子系においてもカオスが存在する事が分かってきた。しかも以下に示すように、そのような状態の発生は対象とする量子系の古典極限における非可積分性に密接に関係している。

非可逆性が物理現象として現れると、エネルギーの一方向への散逸になる。本研究は少数自由度の量子系で果たして散逸が発生しうるのか?という問題を量子カオスとの関連で論じることを主旨とする。さらに問題にしたいのは、もし”散逸”が“カオ

ス”のために実現したとすれば、それはこれまでの理論が記述してきた散逸過程とどのように本質的差異を有するだろうかという点である。さて散逸理論は従来、線形応答理論という形で定式化されてきた。線形応答理論の枠組みは一見して系の動力学のみから散逸係数を導き出す首尾一貫した方法を提供している。しかし問題は、散逸に関与する自由度をどの範囲まで想定すべきかということに関する情報を理論自身が決して提供してくれないことである。しかし、condensed matter physics が従来問題にしてきたような無限自由度の系を考えるかぎり、多くの場合、この問題は次のように便宜的に回避できる：系は（従来の減衰理論が想定しているように）タイムスケールの長いrelevantな自由度とそれに熱だめとして作用する短いタイムスケールの無限自由度系に分離されてしまう。そして、適当な無限自由度の熱だめさえ発見できれば散逸係数は割合簡単に計算できてしまう。その理由は、連続スペクトルを持った熱だめとの相互作用過程に対する摂動展開が一般に収束するためである。この様なモデルで見られる散逸過程は、良く言って普遍的、悪く言ってワンパターンの過程しか現れない。散逸は最低次の摂動過程で律速され、熱だめがカオスによって十分に掻き混ぜられているかいないかというような事情には余り左右されない。私見によれば、線形応答理論によって感受率を計算してきた物性理論家たちが熱だめのエルゴード性の問題などにわずらわされることなく実験事実を説明できたのは以上のような理由によっている。

しかし少数自由度の量子系——たとえば、多原子分子やマイクロクラスター、微粒子などの少数多体系——で散逸が問題になることがあるならば事情が一変することが期待できる。なぜならば、もはや<速い熱だめ>と<遅い主自由度>なる画然たる分離は意味を失い、系全体が散逸に関与するような、したがって、極めて系の個性の詳細を色濃く反映した散逸過程が実現されざるを得ないからである。このような系で見られる散逸過程は決して単一ではなく様々な度合いの散逸があらわれるのではないのだろうか？ 例えば、散逸ストレスの<準散逸>とでもよぶのが相応しいような現象が存在して良いだろう。この研究の目的は、カオスの存在が散逸に関与するような量子系を舞台にして、伝統的ではあるが、古くさい感のある散逸の理論に新しい観点をもたらす事にもある。

我々は、3自由度以上の量子カオス系が非可逆性を示唆する挙動を示すことを実証してきた（たとえばカオス拡散の回復）⁽⁴⁾。しかしながら、この現象がはたして<エネルギーの定常吸収>に代表される伝統的な散逸現象とどの様に具体的に関係しているのか、きちんとした舞台を設定した議論はいまだ行ってこなかった。ここで扱

う系は3自由度以上の量子カオス系である。それを基にして適当な被テスト系を設計し、それを仕事源とをきわめて弱く接触させる。もし仕事源から被テスト系に定常的なエネルギーの流れが実現したならば素朴な意味で散逸が発生したと判定できる。以下に行うように、仕事源をレーザーのような光子源に想定すると、この問題は量子カオスによる光吸収の問題となり、より現実的な意味づけが可能になる。実際、以下で設定するような状況は多原子分子のSEP (stimulated emission pumping) 分光などで実現されている実験的状況に対応させることができる^[9]。同時に、chaotic quantum matter と光との相互作用の研究という新しい分野を拓く事を期待したい。

さて、量子系で散逸的性質があらわれるためには、その古典極限が一定の性質をそなえておらねばならない。2節ではまず古典的な系から出発して系が散逸的挙動を示すための古典的な必要条件、とくに自由度の数について論じよう^[2]。同時に量子系の散逸を存在をテストするシミュレーション法が提案される。3節では2節で論じた古典的条件を理想的な形でみたすあるクラスの高自由度量子系での精密なシミュレーションの結果を報告し、たしかに散逸がカオスにからんで自発的に発生することを示す。4節では高自由度量子カオス系の半古典論を展開し、散逸の自己組織機構をあきらかにする。

2. 古典的必要条件と量子散逸の直接検出法

2.1 古典的条件—大域的経路の発生

孤立した量子系が、他の自由度との相互作用や外界からの作用によって、基底状態から選択的に励起されたとき、その状態が位相にかんする記憶を喪失し励起を基底状態に帰しにくくするためにはその量子状態が他の非常に多くの量子状態と動的に連結をしていることが必要条件になる。位相の複雑化をもたらすような連結はバリスティックな励起の移動を誘発するものであるよりも、ストカステックな移動を誘発するものでなければならない。古典的にこの要請にかなうものがまさにカオスによって誘起される拡散過程である。われわれは、まず古典カオスによっての孤立系内に大域的な動的連結が発生するための条件を考察しよう。

可積分の極限からかんがえる。可積分系の自由度を f とすれば、系は f の固有周波数 $\{\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_f\}$ の多重周期運動になり、これらの周波数は作用変数の組 $\{I_1, I_2, \dots, I_f\}$ が与えられると決定されてしまう。このいみで、周波数は $\Omega_k(\{I_k\})$ と書かれるべきで

ある。もし可積分系に摂動が加わり系が完全可積分状態からはずれると、摂動によって共鳴が発生する^[6]。共鳴が起こるのはこれらの周波数が

$$\sum_{i=1}^f m_i \Omega(\{I_k\}) = 0 \quad (2.1)$$

ここに $\{m_i\}$ は整数の組、なる共鳴条件をみたすような作用空間の超曲面 $R(\{m_i\})$ にそって起こりこれを横断する方向に振動運動がおこる(図-1)。(2.1)を満たす共鳴はたくさんあるのでそれらの相互作用のために、共鳴曲面をサンドイッチのようにはさんで極めて薄いカオスの層が存在しており、そこでは極めて弱いカオス的運動が起きている。そのままではカオス運動は共鳴曲面に横断的な極めて狭い範囲に局在しているにすぎない。しかし別の共鳴がこの運動を共鳴面にそう方向に成分をもつ力にかえることができる。この力をうけて共鳴面に沿った広い領域をつなぐ運動が可能になるかにみえる。これはアーノルド拡散と言われる現象に対応する。しかし、この運動の力は余りにも小さく従って拡散係数は余りにもちいさい。すなわち

$$D \sim \exp\{-\text{const}/K\} \quad (2.2)$$

ここに K は有効摂動強度である。このような運動は当然のことながら量子的には禁制されてしまうだろう。

しかしながら、拡散係数が十分に大きくなりうる場所が存在する。それは、ふたつの異なる共鳴面の交線の近傍である。そこではホモクリニック交差によって生み出されたカオス運動が図-1に示すように激しくおきており、それが第三の共鳴によって共鳴面の交線の成分をもつストカスチックな力に変換され、従って交線に沿って著しい拡散がおこることが期待される。問題はこのような拡散経路が等エネルギー面上の大域的な領域にひろがっているかどうかである。作用空間内で共鳴面の交線の次元は $f-2$ であろう。これに加えてエネルギー保存則が制約として加わるので $f-3$ が拡散経路の次元になる。これが1次元以上であるならば拡散経路は大域的な広がりをもつことになる。したがって

$$f \geq 4 \quad (2.3)$$

がカオスの拡散によってエネルギー面に大域的なつながりができるための条件とかがえられる。すでに述べたように、量子系ではこのような運動が抑制されてしまう可能性が大きい。しかしながら、このような経路がつくられていないかぎり、対応する量子系で散逸的現象が観測される可能性はないだろう。もし考えている量子状態がこの大域的経路にそっているならば、その状態の励起によって他の状態が複雑な位相関係で混入しはじめ、記憶喪失が可能になる。次節以降では、古典極限において上に論じたカオスの拡散の大域的経路が発生するある理想的なクラスの系の量子版をサンプルにとって、散逸が＜量子的相転移＞をへて発生することを示す。

2.2 模擬的光吸収実験

量子系において散逸が発生していることを直接に物理的に意味のあるシミュレーションによって検証するにはどうすればよいのだろうか。後に述べるように散逸の発生はエネルギーレベルを原理的に計算不可能にしてしまう可能性があるのでエネルギー準位の特徴と散逸の発生を関係づけて議論できそうもない。そうすると時間発展から散逸を直接観測する方法をとらざるをえない。もっとも直接的な方法は被テスト系をエネルギー的に十分励起された系（仕事源）と弱く接触させ、実際に仕事源が被テスト系になした仕事が回収されずに被テスト系に一方向のエネルギーの流れとして流れ込むかどうかみればよいだろう。ここでは仕事源としてレーザーのようなコヒーレントな光子源を接触させることをかんがえる。このような仕事源と被験系を計算機の中につくり、それらを弱く結合させて光の吸収が実現されるか否かで散逸の発生をテストする方法を模擬的光吸収実験（simulated light absorption ; S L A）と称する。この手法は任意の量子系が散逸能力をもつか否かをテストする直接的かつ簡便な方法である^{[1], [2]}。

このためには多少の工夫がいる。それをコメントしておこう。被験系のハミルトニアンを H_t と書こう。鍵は被験系に極めて低いエネルギー $-E_g$ を持った仮想的な基底状態 $|g\rangle$ をつけくわえることである。このようにして拡張した系を光子源と遷移双極子相互作用によって結合させる。

$$H_{tot} = H_t - E_g |g\rangle\langle g| + \sum_I C(I) [|I\rangle\langle g| + h.c.] f(t) \quad (2.4)$$

ここに $f(t)$ は周波数 Ω で振動する光の場をあらわす。全系を H_{tot} で動かし、 H_t の期

待値を計算すれば吸収されたエネルギーの時間変化がわかる。

$$I(\Omega, t) = \langle init | U_{tot}(t)^{-1} H_t U_{tot}(t) | init \rangle \quad (2.5)$$

ここに $U_{tot}(t) = T \exp[-i \int_0^t ds H_{tot}(s)/\hbar]$ は発展演算子である。 $I(\Omega, t)$ は時間分解された吸収スペクトルを表している。この方法はもちろん、任意の系をテストするためにつかえる。しかし前節で議論したように量子散逸が観測できるには最低4自由度が必要である。ところが、現在の計算機的能力をもってしてSLA可能な系は高々3自由度系どまりである。そこで我々は任意の自由度で計算機シミュレーション可能な多自由度量子系として<ホスト+ヘルパー系>と呼ばれるクラスの系をとって、以下古典極限でカオスになる量子系での散逸発生可能性を研究しよう。

3. 自発的な散逸の発生

3.1 ホスト+ヘルパー系

<ホスト+ヘルパー(助っ人)系>とは非線形可積分系 I と一定の周波数 ν, ν_k をもつ線形振動子 J, J_k ($k=1, \dots, N_H$) との結合系である^{[1], [2]}。モデルハミルトニアンをもっとも一般的なかたちでかくと、

$$H_t = H_0(I) + \nu J + \sum_{k=1}^{N_H} \nu_k J_k + V(\theta, \phi, \{\phi_k\}) \quad (3.1)$$

ここに I, J, J_k は作用変数(演算子)、 θ, ϕ, ϕ_k は共役な角度変数(演算子)である。系の総自由度数は $f = N_H + 2$ である。 I, J は結合定数 K のフェルミ様相互作用で結合し、 K が増大すると $I + J$ は古典的にカオスになる。 $I + J$ を<ホスト(host)系>と呼ぶ。 J_k は J 以外の自由度(多原子分子になぞらえれば他の振動モード)を表し、 I との結合定数 ϵ はきわめて弱くとる。 J_k を<ヘルパー(helper)モードあるいは<助っ人モード>と呼ぶ。なぜ<助っ人>と呼ばれるかは後程判明する。SLAでは非線形モード I を光の場に直接に結合させる。従ってこれは分子振動分光でいうわゆる<明るいモード>に対応する。これに対して線形モード J, J_k は、<くらいモード>である。

線形振動子は十分高いフォック状態に励起された調和振動子と等価であり、一定の周波数 ν, ν_k などの周波数で振動することを注意しておこう。それにたいし非線形モード I は $H_0(I)'$ で振動する。これらの間に共鳴が発生し、2・1 で議論した機構に従って、図-2 に示すように共鳴の交わりにそった大域的なカオス拡散路が発達する(図中 I_1 は I を、 I_2, I_3 は J, J_1 をいみする。)。この系では線形振動子の周波数が一定であることを反映して2つの共鳴面が平行に走り(たとえば m_1, m_2 を整数として、 $H'_0(I) - m_1\nu = 0$ $H'_0(I) - m_2\nu = 0$ で定まる2面)、この面の間でいたるところ横断的にカオス運動が起きえる。実際にはエネルギー保存則からくる制約のためにそれが表面と2共鳴面の交わり(図-2の黒い影を施した部分)にそってグローバルなカオス拡散が起きる。このように<ホスト-ヘルパー系>では通常より弱い条件 $f > 3$ で古典的な大域的連結が理想的な形で発達しており、SLAをテストするうえで格好の系なのである。

我々は、モード J, J_k が初期に位相固有状態に、モード I が基底状態 $|g\rangle$ に存在することを仮定してシミュレーションを実行する。一見すこし非現実的な位相固有状態を選ぶ理由は後述するようにCPU時間を最短にするための重要な工夫である。現実的には J, J_k の作用固有状態(フォック状態)にとるのが自然であるが、じつはどんな初期状態をとっても十分時間が経過すると初期状態の選択によらなくなることが証明できる。

この系のモデルとしての現実性をテストするために、まずわれわれはヘルパーなしにホストのみでSLAの実験を試みた。ホストにはスタンダード・マップ系を用いた。典型的な吸収スペクトル $I(\Omega, t)$ をみると、吸収線の対が近接するとブロードニングが起こることが見て取れる。これはいわゆる共鳴ブロードニングで、実験的にも分子の振動準位スペクトルによく見られる構造(典型例:ベンゾフェノンでのPrattらの実験)である。もちろんこの広がりとは時間と共に吸収線の針の山の集合に分解されて終わる。この様に我々のモデルは少なくとも実際の分子の振動スペクトルのある側面を模写できる。

ホスト+ヘルパー系の大きなメリットは位相固有状態を初期状態にとると、カノニカル変換によって線形振動子を消しさり周期的外力に駆動された1自由度系に変換できることである。とくにうまく V を選ぶとホストが量子写像系(kicked rotor系)になってSLAに伴う数値計算がほとんど誤差なしに実行できる。計算が厳密に実行されているか否かは時間反転実験によって確かめられた。

3.2 実験事実にもとづく主張

以下の結果はホスト系がどんな量子写像に変換される場合でも当てはまるが、一様系として知られる<アーノルド猫>に変換されるときに特にはっきりとしたステートメントが得られる^{[1], [2]}。

(1) ホスト系が助っ人と結合していない、つまり $\epsilon = 0$ の時には吸収エネルギー $I(\Omega, t)$ は再帰的な時間発展を示すにすぎない。しかし結合が入るとホストが古典極限で可積分かカオスかによってまったく異なった挙動が現れる。(甲) ホストが可積分の場合、 ϵ が大きくなっても再帰的な時間発展を示すに過ぎないが、(乙) 図-3に示すようにカオスの場合には古典的に無視し得るほど小さい臨界値 ϵ_C で劇的な変化が起こり、吸収エネルギーは時間に比例した増大をしめすようになる。(図-3は代表的な2つの Ω での吸収エネルギーの時間変化をしめす。(a) から (d) の順に ϵ は増える。(a)(b) $\epsilon < \epsilon_C$ (d)(e) $\epsilon > \epsilon_C$)

(2) (甲) の場合および(乙) の $\epsilon < \epsilon_C$ の場合、スペクトル $I(\Omega, t)$ は時間と共に線スペクトルに分解される。しかし(乙) で $\epsilon > \epsilon_C$ の場合には $I(\Omega, t)$ は図-4に示すように t に比例する連続成分をもつ。(図-4は吸収スペクトル $I(\Omega, t)$ の時間発展をあらわす。 t は時刻。(b) は (a) の一部を5倍拡大してある。時間とともにピークは細かく砕かれて行くが決してデルタ関数的ピークに分解せずしかも必ず連続背景成分をもっている。)

以下は最も興味ある(乙) の $\epsilon > \epsilon_C$ の場合に関するものである。 $\epsilon > \epsilon_C$ で現れる状態を<散逸相>、 ϵ_C で起きる散逸相への相転移を<散逸相転移>と呼ぶ。 ϵ_C はプランク定数に比例することが実験的に分かっている。

(3) $I(\Omega, t)$ 時間変化には t に比例する部分に加えて、極めて非定常な揺らぎが伴う。スペクトルとして見るとこの揺らぎは、連続成分の上に立つピーク構造に起因する。ピーク構造は時間と共にさらに微細構造に分裂してゆき、入れ子構造を作る(図-4)。この分裂過程は際限なく起こり、入れ子構造の発達が時間的な非定常揺らぎとして観測される。図-5にピークの位置が時間=分解能とともに次々と分岐してゆく様相をしめしておいた。

(4) 自己相似なピーク構造成分はプランク定数に比例する。連続成分は $O(1)$ である。それゆえ自己相似ピーク成分は<量子成分>と呼ばれる。スペクトルの Ω に関するフーリエ成分 $C(\tau)$ は波数 τ (時間の次元をもつ) と共に代数的に $|C(\tau)|^2 = \tau^{-\eta}$

の様に減衰する。指数 η は $\epsilon > \epsilon_C$ で正になり散逸相転移のオーダーパラメーターと見なすことができる。図-6に η を ϵ の関数としてしめた。データは \circ * $+$ の順に \hbar が倍加している。臨界値 ϵ_C が \hbar に比例することがみてとれる。 η は $\epsilon \sim \epsilon_C$ で臨界揺らぎを伴う。さらに $\epsilon \gg \epsilon_C$ で η は $N_H/2$ (N_H は<ヘルパー>の数)に漸近する。線形応答理論-一次節参照-によると $C(\tau)$ は<ホスト+ヘルパー>系のグリーン関数とみなして良い。

上の実験ではホスト系をトーラスの上で定義している。これはホスト系がカオスになってもそれを張る量子状態数を有限にしておきたいからである。連続成分の出現は<ヘルパー>モードの可算無限個の量子状態が全てホスト系の"古典カオス"によってむすびついた(あるいは<ヘルパー>の全量子状態がホストに取り込まれた-involved-)ことを示唆している。実際、<ヘルパー>モードの量子状態数を有限($=M\alpha$)にしておいて全系のエネルギー固有値を計算すると $\epsilon > \epsilon_C$ の場合に限って、 $M\alpha \rightarrow \infty$ で固有値は収束しないことが示され、上の仮説の強い証拠を提供している。換言するならば、少なくとも ϵ が小さい限りもっとも効率が良かった作用変数固有状態による摂動展開が収束しなくなってしまったのだ。この状況は古典力学において不変曲線へのカノニカル変換の収束性が破れ、非解析的挙動があらわれる状況に酷似している。もし解析的ないかなる基底から出発しても収束不能であれば固有状態は計算不可能とかんがえられるだろう。いずれにせよ散逸状況において波動関数は極めて複雑な様相-場合によってはいたるところ微分不可能な-を呈しているとかんがえられる。さていづれにせよ上にのべた事実は、仮に<ヘルパー>に対応する自由度の量子状態数が有限であっても、 $\epsilon > \epsilon_C$ では全系のエネルギー吸収への関与の仕方が質的に変化していることを示唆する。この場合 $t \rightarrow \infty$ まで定常吸収が持続することは有り得ないが、定常散逸がみられるタイムスケールは $\epsilon < \epsilon_C$ の場合に比べて質的に長くなり<準散逸>とよんで良いような状況が実現している。量子状態の数に上限のある現実の量子系では定常吸収は上の意味で過度的である。

かくして極くわずかな<ヘルパー>の助けでホストは相転移的にカオスを顕在化させたのである。吸収されたエネルギーは平均としては<ヘルパー>にはたまらずホストにたまる

4. 半古典理論

4.1 多自由度カオス系への半古典論の適用—記憶展開

3・2の著しい結果を説明するためには例えばカオスという古典的概念と量子現象を結び付ける理論でなければならない。今の所この要求を満たすのは半古典理論のみである^[1]。しかし半古典理論はカオス系への適用に際して様々の障害をもたらすことが予想されている^[6]。もっとも本質的な問題は、適用できるタイムスケールが極めて短い事であろう。さらに、技術的困難としては、我々の系は本質的に3自由度以上の系であり、自由度の増大は半古典論の実際的な計算を著しく困難にする。

我々は以下のような手順で半古典論をこの問題に適用した^{[1], [2]}。まず光源との結合が弱い極限を想定する。すると線形応答理論的取扱いができて、autonomous表現から出発して定義される時間依存吸収スペクトルを、孤立した<ホスト+ヘルパー系>さらにそれからヘルパーを消去した<時間依存系>のグリーン関数の有限時間フーリエ変換として表す公式を導くことができる。これは一般に複数個の線形振動子と結合したどんな非調和振動子にでもつかえるなかなか重宝な公式である。例えば、この公式によって時間依存吸収スペクトルが、一般に線形振動子の初期状態に鈍感であることが示されて、3・2の計算機実験で採用した最もCPU時間の短い初期状態一位相固有状態—を使うことが正当化される。さて、つぎの仕事はグリーン関数を半古典的に評価することである。半古典グリーン関数は経路積分によって評価できる。我々の系がトーラス上で定義されているためにおきる多少面倒な問題を除いて、通常通りの半古典定式化ができる。グリーン関数は<ホスト+ヘルパー>の初状態(i)と終状態(f)を結ぶすべての古典軌道に沿った[古典ラグランジアン]/ \hbar を位相とする指数因子に振幅因子をかけて合算したものになる。

ここで上に記した大自由度なるが故の困難を除くための工夫が必要になる。その工夫は次のようなものである。まずホストとヘルパーを切り離しそれぞれの古典軌道(裸の軌道)をもとめる。両者を結合させた結果生じる軌道のずれをキモノと呼ぶ。散逸相のすべてはキモノのなかに含まれている。一般にキモノは裸の軌道の時間非局所的な情報から決定されるが、カオスの場合に限って軌道不安定性のために裸の軌道の時間局所的情報で決定されるという特徴がある。これは接線場の時間発展演算子のグリーン関数がカオス軌道の乱雑さのためにアンダーソン局在(これは純古典的現象で量子カオスのアンダーソン局在とはなんの関係もない)を引き起こすためである。局在長がまさにリアプノフ数の逆数で決まる事を利用すると、キモノを裸の軌道の局所

情報から $\exp\{-\text{(リヤプノフ数)}\}$ のべき展開で計算できる。この方法を記憶展開とでもよぼう。この方法によって実際の計算が非常に簡単になると同時に、半古典グリーン関数に極めて見通しの良い表現を与える。一般に最低次の記憶展開による半古典グリーン関数は形式的に

$$G(t) = \sum_m A^{(m)}(t) D^{(m)}(t) \exp[iS^{(m)}(i, f, t)/\hbar] \quad (4.1)$$

と書ける。 $A^{(m)}(t)$, $S^{(m)}(i, f, t)$ は裸の軌道の振幅因子と古典 action、 $D^{(m)}(t)$ は混合因子と呼ばれる部分でホスト-ヘルパー系固有の因子である。振幅因子は古典的意味を持つ。しかし、混合因子は同じホストの軌道 (m) に沿って異なる位相でヘルパーが出発したため、キモノ間量子的干渉が起きて出てきた古典的意味づけ不能の因子である。

<アーノルド猫>をホストにとった場合を例にとって $G(t)$ を数値的に評価することが試みられた。孤立した<猫>では、半古典論は量子論に厳密に一致する。試したいことは散逸が発生しているような<ヘルパー>との強結合領域での半古典論が work するかどうかという点である。良く知られているようにカオス系では軌道数の指数関数的爆発のために、時間の経過と共に半古典グリーン関数の数値的評価は困難になる。それと同時に古典軌道和の収束性にも問題が出てくる。我々は計算可能なタイムスケール(軌道数最大 200 万個; $t < 17$) までグリーン関数を計算した。図-7(a) に示すように少なくともそのタイムスケールで半古典論は強結合領域 ($\epsilon \gg \epsilon_c$) においてもほぼ完璧に量子論の結果を再現する(実線が純量子論、+マークが半古典論である)。さらに誤差の解析の結果(図-7(b) を見よ)、半古典論は強い散逸的領域においてさえ、十分長いタイムスケールにわたって ($t < 70$)、量子論の結果を再現することが分かった。このように少なくとも<猫+ヘルパー>系では、半古典論が自己組織された散逸を解明する武器としてつかえることが分かってきた。それでは散逸の発生機構をどの様にして半古典的に解釈できるだろうか?

4.2 軌道間相関とそれを打ち消す機構

散逸の原因がすべてヘルパーの存在がもたらす混合因子 $D^{(m)}(t)$ に押し込められていることは疑いない。第一の重要な事実はもしホストの軌道 (m) がカオス軌道である場合には、destructive interference が起きて $D^{(m)}$ が代数的に減衰する事である。この減衰の原因はそれぞれの裸のカオス軌道が行う拡散運動にもとめられる。それと同時にキモノは "optimal dress phase" $\Delta S^{(m)*}$ とよばれる付加的な位相を生み出す。即ち

$$D^{(m)}(t) \sim t^{-N_H/4} \sum_m \exp[i\Delta S^{(m)*}/\hbar] \quad (4.2)$$

$D^{(m)}(t)$ の代数的減衰が $G(t)$ を支配するなら話は簡単である。しかし事はそれ程簡単ではない。理由は、その数が指数関数的に増大する異なる軌道に沿った裸の作用 $S^{(m)}(i, f, t)$ の間には顕著な相関が存在するためである。ちょっと考えると与えられた始点と終点を結ぶカオス軌道どうしに何らかの相関があるとはかんがえにくい。しかしこの相関を無視すれば量子確率振幅は古典分布関数と一致してしまい(後述)量子系特有の再帰現象はおこらなくなってしまう。実際ヘルパーを除いた裸のカオス系のグリーン関数は再帰的な振る舞いをし古典カオスとは似ても似つかぬ挙動をしめしたのである。

古典カオス軌道間の相関とはどういうものなのだろうか? これは量子カオスの半古典論のもっとも奥の深い問題であって、ほとんど何もわかっていないといっている(これは純古典論の問題である!)。最近首藤と筆者はカオス拡散の量子抑制の問題の文脈で軌道相関の問題をとりあげ、その一端を明かにした^[9]。これは、上の混合因子の役割を解釈するうえで貴重な情報をもたらすのでそれについてふれておく。ヘルパーを除いた裸の量子カオス系をかんがえる。序論でも述べたようにある条件でこの古典極限はカオス拡散を示す。ところがその量子版は拡散を禁止されてしまう。これを最初に発見したのは Casati たちであり^[10]、その後 Maryland のグループがこの現象をアンダーソン局在と関係づけて理解しようとした^[11]。量子的抑制を半古典理論で解釈しようとするればそれは拡散に寄与するカオス軌道間の相関に求めざるをえない。首藤らはカオス拡散の量子抑制に関する半古典論を展開し次のような結論に達した。半古典確率振幅は(4.1) から

$$|G(t)|^2 = P_{class} + const. \int_{-\infty}^{\infty} dS g_P(S) \exp[-iS/\hbar] \quad (4.3)$$

のようになる。ここに P_{class} は古典分布関数、そして

$$g_P(S) = \sum_{m,m'} \delta(S - S^{(m)}(i, f) + S^{(m')}(i, f)) / (N(N-1)), \quad (N: \text{number of trajectories}) \quad (4.4)$$

は作用対の分布関数である。軌道に相関がないとは $g_P(S)$ がノッペラボーなガウス分布になることを意味する。確かに、図-8 に示すように $g_P(S)$ の概形はガウス分布（実線でなぞったもの）になる。もしそうならば半古典論は完全に古典論と一致してしまい局在効果を表現できない。ところが $g_P(S)$ には概ね周期的な小さいピーク構造がつきまとっているのが見てとれる（ $S \sim 0$ 近傍に注目）。この構造によって半古典論波動関数(4.3)に局在現象（完全にではないが）があらわれるのである。全体から見ればごく一部の軌道に相関が存在しそれが作用分布のピーク構造になってあらわれる。

それでは軌道にどういう現象が起これば相関が発生するのだろうか？ 実はそれは軌道に介在する＜欠陥(defect)＞のせいであることがわかってきた。 $g_P(S)$ にピークをもたらし軌道は（時間的）基本構造を同じくするがその中に欠陥が介在しており異なる場所に欠陥をふくむ軌道の族なのである。位相空間をマルコフ分割し軌道各時間ステップごとに整数でシンボル表示する。すると欠陥をふくむ軌道は $t = 22$ を例にとると；

0110 <u>1</u> 00110011001100110	(1-defect)
0110 <u>1</u> 001110 <u>1</u> 001110 <u>1</u> 00110	(3-defects)
0110 <u>1</u> 0011000 <u>1</u> 111 <u>0</u> 00110	(3-defects)

のようになる。下線部が欠陥をいみする。局在した欠陥を置き換える場合の数だけエントロピーをかせいげるのでこのような軌道の族は無視できなくなりピークをつくる。

もし、＜再帰性－相関＞を生み出す原因が局在した欠陥にあることが一般的ならば、なぜ混合因子が再帰性を崩壊させたかが次のようにして理解できる。 ϵ に関する最低次の近似によると”optimal dress phase” $\Delta S^{(m)*}$ は

$$\Delta S^{(m*)} = \epsilon \sum_{s=0}^t \cos(\{\nu_i s\}) V_0(\theta(s)) \quad (4.5)$$

のように表される。すなわち本質的に裸のカオス軌道 $\theta(s)$ ($s = 1, \dots, t$) の時間フーリエ変換になっているわけである。もし図-8のピークを作り出すような族をなす相関軌道の差が局在欠陥の位置だけならば、軌道がもつ裸の作用 ((4.1) の $S^{(m)}(i, f, t)$) は欠陥の結合エネルギーの差だけになってその分布ははっきりとした値に集中し、それがピークをつくりだしたが、他方、それがつくる dress phase は軌道の時間フーリエ変換であり欠陥の位置に鋭敏な量である。よって欠陥位置の違いは $\Delta S^{(m*)}$ にランダムな値を帰結する。このためにそれぞれの軌道からの (4.1) の位相への全寄与

$$\{S^{(m)}(i, f, t) + \Delta S^{(m*)}\}/\hbar$$

は相関を失いそのために減衰因子 $t^{-N_H/4}$ が効果をあらわして、 $G(t)$ が減衰したものと考えることができる。 $\Delta S^{(m*)}/\hbar \sim \epsilon/\hbar$ であることを考慮すると $\epsilon/\hbar > 1$ で散逸相転移が起きたこと (3・2の(4)をみよ) がよく説明される。

多少擬人的にこの様子を表現してみよう： ヘルパーは普通の量子系では問題にならない古典カオス軌道の＜ミクロな構造＝局在欠陥＞を読み出して系にフィードバックした。そのために通常の2自由度量子カオス系で一般に存在する軌道間相関（これは軌道の非局所構造に関係する）が破れて、destructive interference が顕在化したのである。上の議論から $\epsilon \gg \hbar$ で

$$|C(\tau)| \sim \hbar^{1/2} (\tau^{-1/2} \hbar / \epsilon)^{N_H/2} \quad (4.6)$$

という普遍的な結果が得られ、この結果は数値実験とよく一致する。

5. エピローグ

さいごに実験との関係について一言触れておく。以上の結果は3自由度以上結合振動子系について当てはまるはずであり、アセチレンのような多原子分子系でも観測されるべき現象である。実際、アセチレンの高励起スペクトルでは準連続スペクトル領域で何段階かの高次（入れ子）構造が存在することが報告されているが、連続成分が高解像度極限でも存在するかどうかは今の所はっきりしない。解像度と連動させた再近接レベル間隔統計やスペクトルのフーリエ変換の相似則などから、有限の解像度で散逸相のスペクトルか否かを判定できるような方法を提案する必要がある。Fieldらはアセチレンにおいて低い解像度でアサイン可能、高解像度でアサイン不能かつ多段の高次構造をもったスペクトルを観測している^[12]。これが、散逸相のスペクトルである可能性は低いが、同様の性質をもったスペクトルが1で導入したモデルでも再現でき、かつその近傍に散逸相が存在することから類推すると、アセチレンでももう少し高励起側に散逸相が存在する可能性はある。

我々がここで提案したモデルが現実の多原子分子振動状態と差を持つことは否定できない。すこし人工的ではあるが我々のモデルを完全に模擬する実験可能な系は簡単に作り出せる。それには、原子のリュードベリ状態あるいは単分子の高励起振動状態への励起による吸収（放出）を近多重共鳴環境下で観測すれば良い。近共鳴光子（複数個）は線形モード J , $J\alpha$ の役割を果たしドアウエイ状態様の散逸相スペクトルが観測できる（発表予定）。

少数自由度系で自発的な散逸が発生する量子系は（量子）カオス系だけとはかぎらない。空間的なランダムネスも自発的非可逆性を誘発する可能性がある。実際、不規則ポテンシャルで散乱される電子系でも数個のフォノンモードが存在するだけで電子系からフォノン系への非可逆的なエネルギー輸送が発生することが報告されている^[13]。この機構もここで論じたカオスによって組織された散逸の機構と共通点がみられる。

REFERENCES

1. K. Ikeda, *Ann. Phys. (N.Y.)* **227** (1993) 1
2. K.S.Ikeda, "Self-organized dissipation in classically chaotic quantum systems with a small number of degrees of freedom" to be published in *Computational Physics as a New Frontier of Condensed Matter Physics* ed. H. Takayama et al (Phys. Soc. Japan, 1995)
3. K. Ikeda, S. Adachi, and M. Toda, *Phys. Lett. A* **147** (1990) 189; K. Ikeda, *Phys. Lett. A* **168** (1992) 248
4. S. Adachi, M. Toda, and K. Ikeda, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 659; M. Toda, S. Adachi, and K. Ikeda, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **98** (1989) 323
5. See for example, *J. Opt. Soc. Am. B* **7** NO.9 (1990)
6. 古典力学の共鳴とカオスに関しては、たとえば A. J. Lichtenberg and M. A. Leiberman *Regular and Stochastic Motions* (Springer-Verlag, Berlin, 1984)
7. M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1990); M. V. Berry and J. Keeting, *J. Phys. A* **23** (1990) 4839; P. Cvitanovic and B. Eckhardt, *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989) 823
8. A. Voros, *J. Phys. A* **21** (1988) 685; B. Eckhardt and E. Aurell, *Europhys. Lett.* **23** (1989) 509
9. A. Shudo and K. Ikeda, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **116** (1994) 283
10. G. Casati, B. V. Chirikov, F. M. Izrailev, and J. Ford, in *Stochastic Behaviors in Classical and Quantum Hamilton Systems* (Springer-Verlag, Berlin, 1979) ed.by G. Casati and J. Ford
11. S. Fishman, D. R. Grempel and R. E. Prange, *Phys. Rev. Lett.* **45** (1982) 509
12. R. W. Field, S. L. Coy, and A. Ann B. Solina, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **116** (1994) 143
13. H.Yamada and K.S.Ikeda, in preparation

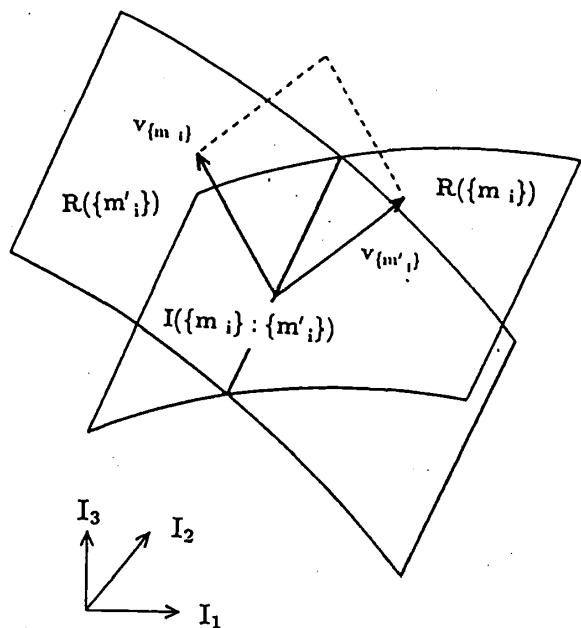


図 - 1

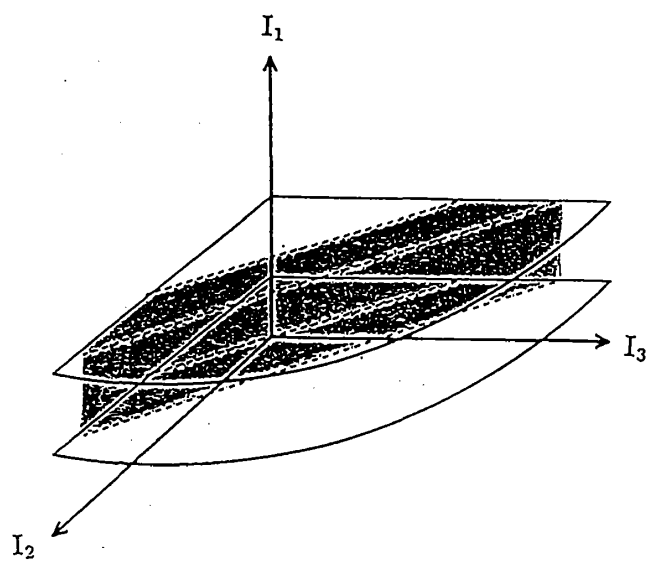


図 - 2

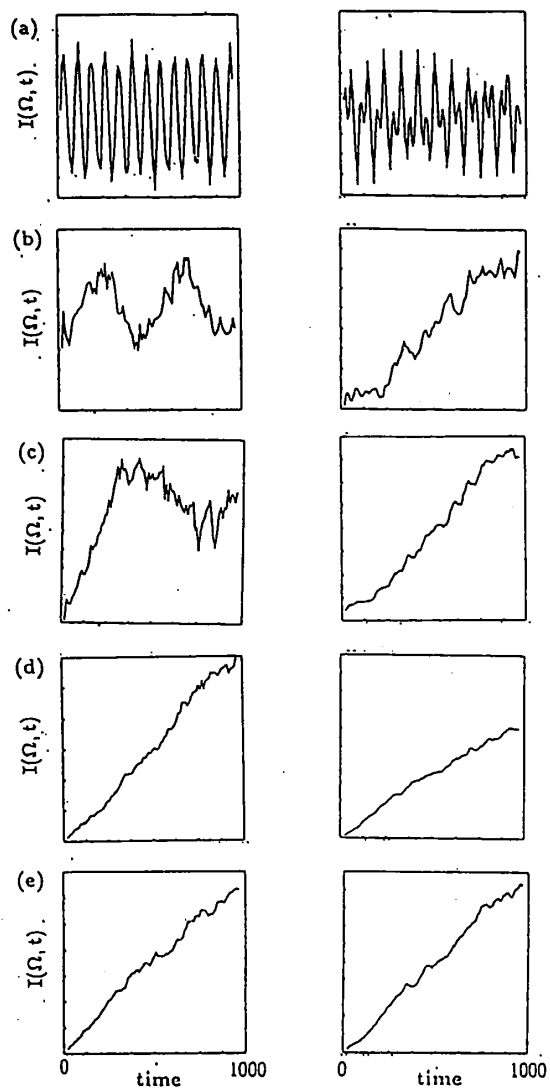


図 - 3

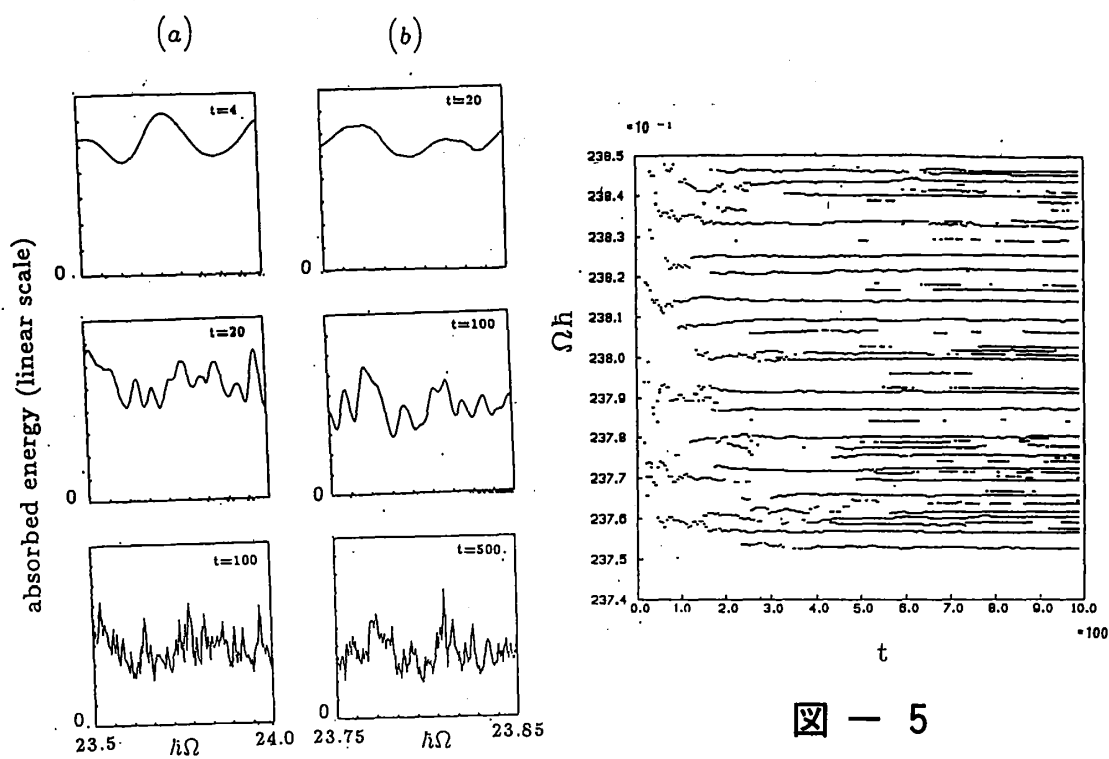


図 - 5

図 - 4

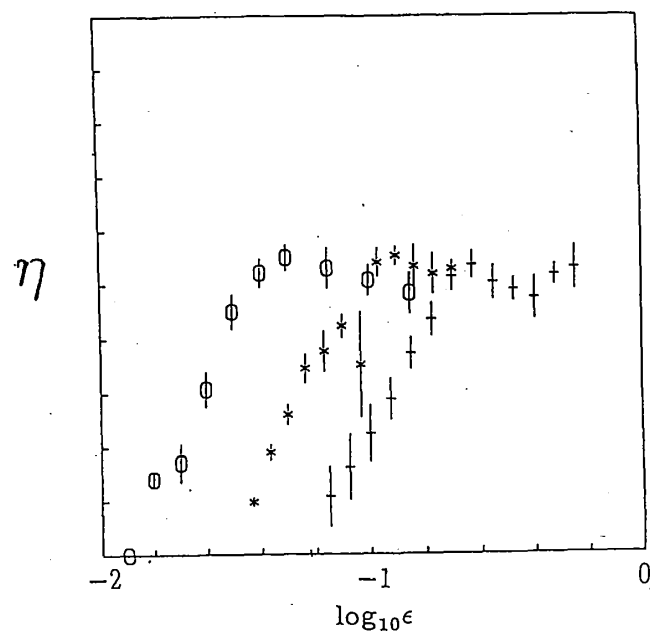


図 - 6

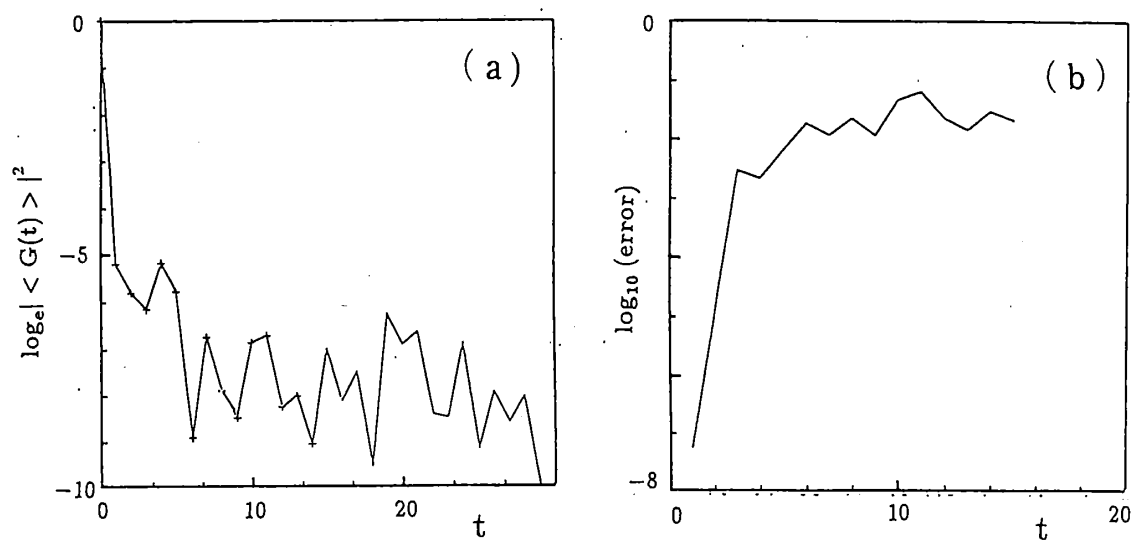


図 - 7

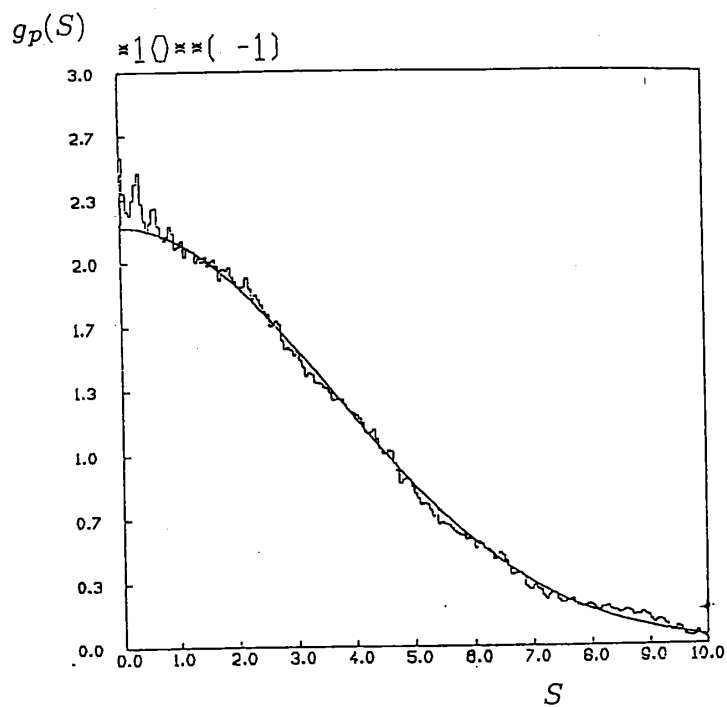


図 - 8